

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 2001-349849

(43)Date of publication of application : 21.12.2001

(51)Int.Cl.

G01N 23/20

(21)Application number : 2001-088656

(71)Applicant : RIGAKU CORP
TOKYO ELECTRON LTD

(22)Date of filing : 26.03.2001

(72)Inventor : OMOTE KAZUHIKO
ALEXANDER URIYANENKOFU
KAWAMURA SHIGERU

(30)Priority

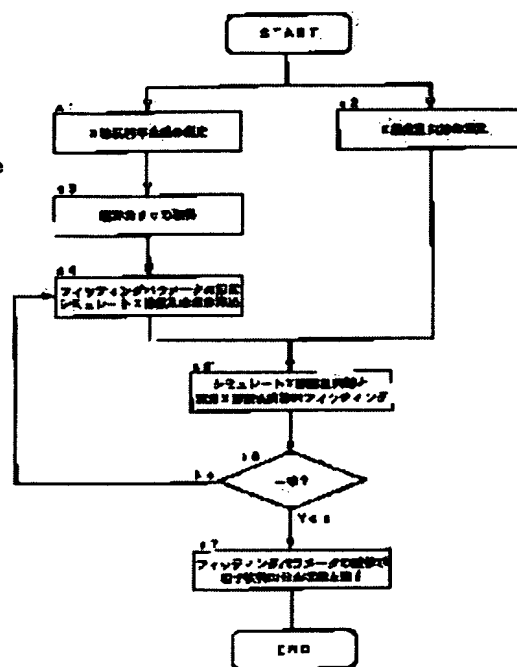
Priority number : 2000102781 Priority date : 04.04.2000 Priority country : JP

(54) UNEVEN-DENSITY SAMPLE ANALYZING METHOD AND ITS APPARATUS, AND SYSTEM

(57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide an entirely new uneven-density sample analyzing method, apparatus, and system capable of easily and highly accurately analyzing the state of distribution of particulate matter in an uneven-density sample, such as a membrane and bulk body.

SOLUTION: In the uneven-density sample analyzing method for analyzing the state of distribution of a particulate matter in the uneven-density sample, by using a scattering function to simulate an X-ray scattering curve, according to a fitting parameter which indicates the state of distribution of the particulate matter, the simulation X-ray scattering curve is computed under the same condition as the measurement conditions of an actual X-ray scattering curve. While the fitting parameters are altered, the simulated X-ray scattering curve and actual X-ray scattering curve are fitted to each other, and the values of the fitting parameters when the simulated X-ray scattering curve matches with the actual X-ray scattering curve are taken as the state of distribution of the particulate matter in the sample.



LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

28.02.2005

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2001-349849

(P2001-349849A)

(43) 公開日 平成13年12月21日 (2001. 12. 21)

(51) Int. Cl.
G 0 1 N 23/20

識別記号

F I
G 0 1 N 23/20

データシート (参考)
2 G 0 0 1

審査請求 未請求 請求項の数18 O L (全 23 頁)

(21) 出願番号 特願2001-88656(P2001-88656)
(22) 出願日 平成13年3月26日 (2001. 3. 26)
(31) 優先権主張番号 特願2000-102781(P2000-102781)
(32) 優先日 平成12年4月4日 (2000. 4. 4)
(33) 優先権主張国 日本 (J P)
特許法第30条第1項適用申請有り 2000年11月20日~24日 日本学術振興会開催の「The 3rd International Symposium on Advanced Science and Technology of Silicon Materials」において文書をもって発表

(71) 出願人 000250339
理学電機株式会社
東京都昭島市松原町3丁目9番12号
(71) 出願人 000219967
東京エレクトロン株式会社
東京都港区赤坂5丁目3番6号
(72) 発明者 表 和彦
東京都昭島市松原町3-9-12 理学電機株式会社内
(74) 代理人 100105223
弁理士 岡崎 謙秀 (外1名)

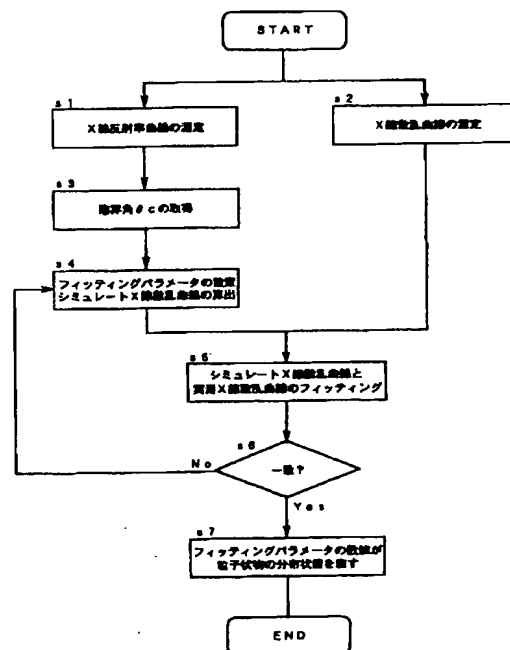
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 密度不均一試料解析方法ならびにその装置およびシステム

(57) 【要約】

【課題】 薄膜やバルク体などの密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を簡易に高精度で解析することのできる、全く新しい密度不均一試料解析方法、密度不均一試料解析装置、および密度不均一試料解析システムを提供する。

【解決手段】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析方法であって、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線をシミュレートする散乱関数を用いることにより、実測X線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレートX線散乱曲線を算出し、フィッティングパラメータを変更しながらシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティングを行い、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とする。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析方法であって、

粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線を表す散乱関数を用いることにより、実測X線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレートX線散乱曲線を算出し、

フィッティングパラメータを変更しながらシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティングを行い、

シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とすることを特徴とする密度不均一試料解析方法。

【請求項2】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析方法であって、

粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従って粒子線散乱曲線を表す散乱関数を用いることにより、実測粒子線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレート粒子線散乱曲線を算出し、

フィッティングパラメータを変更しながらシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線とのフィッティングを行い、

シミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とすることを特徴とする密度不均一試料解析方法。

【請求項3】 フィッティングパラメータが粒子状物の平均粒径および分布広がりを示すものであり、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の平均粒径および分布広がりとする請求項1または2の密度不均一試料解析方法。

【請求項4】 フィッティングパラメータとして粒子状物相互の最近接距離および相関係数を示すものであり、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物相互の最近接距離および相関係数とする請求項1または2の密度不均一試料解析方法。

【請求項5】 フィッティングパラメータが粒子状物の含有率および相関距離を示すものであり、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の含有率および相関距離とする請求項1または2の

密度不均一試料解析方法。

【請求項6】 実測X線散乱曲線または実測粒子線散乱曲線を $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \text{オフセット角} \Delta\omega$ の条件、 θ_{in} を一定にして θ_{out} をスキャンする条件、 θ_{out} を一定にして θ_{in} をスキャンする条件のいずれかの条件で測定し、その測定条件と同じ条件にて散乱関数によりシミュレートX線散乱曲線またはシミュレート粒子線散乱曲線を算出する請求項1ないし5のいずれかの密度不均一試料解析方法。

10 【請求項7】 散乱関数として、屈折、散乱、および反射のうちの少なくとも一つを考慮した吸収・照射面積補正、もしくは粒子状物相関関数、またはそれら両方を導入したものをを用いる請求項1ないし6のいずれかの密度不均一試料解析方法。

【請求項8】 密度不均一試料が薄膜またはバルク体である請求項1ないし7のいずれかの密度不均一試料解析方法。

【請求項9】 薄膜がポーラス膜であり、粒子状物がポーラス膜を形成する微粒子あるいは空孔である請求項8のいずれかの密度不均一試料解析方法。

20 【請求項10】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析装置であって、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線を表す散乱関数を記憶する関数記憶手段と、

関数記憶手段からの散乱関数を用いることにより実測X線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレートX線散乱曲線を算出するシミュレート手段と、

フィッティングパラメータを変更しながらシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティングを行うフィッティング手段と、を有しており、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とが一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とすることを特徴とする密度不均一試料解析装置。

【請求項11】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析装置であって、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従って粒子線散乱曲線を表す散乱関数を記憶する関数記憶手段と、

関数記憶手段からの散乱関数を用いることにより実測粒子線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレート粒子線散乱曲線を算出するシミュレート手段と、

フィッティングパラメータを変更しながらシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線とのフィッティングを行うフィッティング手段と、を有しており、シミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線とが一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とすることを特徴とする密度不均一試料解析装置。

【請求項12】 実測X線散乱曲線または実測粒子線散乱曲線を $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \text{オフセット角} \Delta\omega$ の条件、 θ_{in} を一定にして θ_{out} をスキャンする条件、 θ_{out} を一定にして θ_{in} をスキャンする条件のいずれかの条件で測定した場合に、シミュレート手段は、その測定条件と同じ条件にて散乱関数によりシミュレートX線散乱曲線またはシミュレート粒子線散乱曲線を算出する請求項10または11の密度不均一試料解析装置。

【請求項13】 散乱関数として、屈折、散乱、および反射のうちの少なくとも一つを考慮した吸収・照射面積補正、もしくは粒子状物相関関数、またはそれら両方を導入したものが関数記憶手段に記憶されている請求項10ないし12のいずれかの密度不均一試料解析装置。

【請求項14】 密度不均一試料が薄膜またはバルク体である請求項10ないし13のいずれかの密度不均一試料解析装置。

【請求項15】 薄膜がポーラス膜であり、粒子状物がポーラス膜を形成する微粒子あるいは空孔である請求項14の密度不均一試料解析装置。

【請求項16】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析するための密度不均一試料解析システムであって、密度不均一試料の実測X線散乱曲線を測定するX線測定装置と、請求項10、12、13、14、15のいずれかの密度不均一試料解析装置とを備えており、X線測定装置による実測X線散乱曲線および散乱関数の計算に必要な測定時の各種パラメータが密度不均一試料解析装置によって使用可能となっていることを特徴とする密度不均一試料解析システム。

【請求項17】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析するための密度不均一試料解析システムであって、密度不均一試料の実測粒子線散乱曲線を測定する粒子線測定装置と、請求項11、12、13、14、15のいずれかの密度不均一試料解析装置とを備えており、粒子線測定装置による実測粒子線散乱曲線および散乱関数の計算に必要な測定時の各種パラメータが密度不均一試料解析装置によって使用可能となっていることを特徴とする密度不均一試料解析システム。

【請求項18】 密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析方法であって、密度不均一試料がポーラス膜である場合に、X線散乱曲線の測定結果を用いて、ポーラス膜内の粒子状物の分布状態を解析することを特徴とする密度不均一解析方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】この出願の発明は、密度不均一試料解析方法ならびにその装置およびシステムに関するものである。さらに詳しくは、この出願の発明は、薄膜やバルク体などの密度不均一性の評価に有用な、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を簡易に、且つ高精度で解析することのできる、新しい密度不均一試料解析

方法、密度不均一試料解析装置、および密度不均一試料解析システムに関するものである。

【0002】

【従来の技術とその課題】様々な目的で作製される薄膜やバルク体には、所望しない粒子状物が混入してしまったり、意図的に粒子状物が混入されているといったことがしばしばある。この粒子状物の分布にともなう、薄膜やバルク体は密度不均一性を有することになる。また、薄膜は成膜方法によって粒径が不均一になる場合がある。このような密度不均一薄膜あるいは密度不均一バルク体の形成および使用において密度不均一性を評価することは、その様々な利用分野の別を問わず極めて重要である。たとえば、一般的に意図的な粒子状物の場合、各々の粒子径ができるだけ揃っていることが好ましいと考えられており、その実現には密度不均一性の評価が不可欠である。

【0003】密度不均一性を評価するには、粒子状物の大きさやその分布領域（すなわち密度不均一な領域）の大きさなどのような粒子状物の分布状態を、客観的に解析する必要がある。従来より、たとえば密度不均一性あるいは空孔粒径を解析する方法としては、窒素ガスを吸着する時間から粒子状物自体およびその分布領域の大きさを解析するガス吸着法や、散乱角 $0^\circ \sim$ 数度の範囲でX線が散乱される現象を利用して分布領域の大きさを解析するX線小角散乱法などが知られている。

【0004】しかしながら、ガス吸着法では、測定に時間を要するうえ、ガスが内部に侵入できないタイプの空孔については測定不可能であるなどの問題があり、また従来のX線小角散乱法では、通常試料を透過させて測定するため、基板上的薄膜に対しては薄膜を基板から剥がして測定する必要があるなどといった問題があり、基板上的薄膜物質の密度不均一性を正確に解析することは不可能であった。

【0005】このため、非破壊、且つ短時間での粒子状物の分布状態の解析が可能な、様々な種類の密度不均一薄膜や密度不均一バルク体に対して適用できる密度不均一試料解析方法の実現が切望されている。また、より高度な機能を追求するにつれて粒子状物の縮小化が著しく、数ナノメートルオーダ以下の粒子状物や分布領域の大きさを高精度で解析する必要性も増加してきている。

【0006】この出願の発明は、以上の通りの事情に鑑みてなされたものであり、従来技術の問題点を解消し、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を簡易に高精度で解析することのできる、全く新しい密度不均一試料解析方法、密度不均一試料解析装置、および密度不均一試料解析システムを提供することを課題としている。

【0007】

【課題を解決するための手段】この出願の発明は、上記の課題を解決するものとして、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析方法であ

って、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線または粒子線散乱曲線を表す散乱関数を用いることにより、実測X線散乱曲線または実測粒子線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレートX線散乱曲線またはシミュレート粒子線散乱曲線を算出し、フィッティングパラメータを変更しながらシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティング、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線とのフィッティングを行い、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とすることを特徴とする密度不均一試料解析方法（請求項1）（請求項2）を提供し、この解析方法において、フィッティングパラメータを粒子状物の平均粒径および分布広がりを示すものとし、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の平均粒径および分布広がりとする（請求項3）や、フィッティングパラメータとして粒子状物相互の最近接距離および相関係数を示すものであり、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物相互の最近接距離および相関係数とすること（請求項4）や、フィッティングパラメータを粒子状物の含有率および相関距離を示すものとし、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線が一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の含有率および相関距離とすること（請求項5）や、実測X線散乱曲線または実測粒子線散乱曲線を $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \text{オフセット角} \Delta\omega$ の条件、 θ_{in} を一定にして θ_{out} をスキャンする条件、 θ_{out} を一定にして θ_{in} をスキャンする条件のいずれかの条件で測定し、その測定条件と同じ条件にて散乱関数によりシミュレートX線散乱曲線またはシミュレート粒子線散乱曲線を算出すること（請求項6）や、散乱関数として、屈折、散乱、および反射のうちの少なくとも一つを考慮した吸収・照射面積補正、もしくは粒子状物相関関数、またはそれら両方を導入したものを用いること（請求項7）などをも提供する。

【0008】また、この出願の発明は、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析装置であって、粒子状物の分布状態を示すフィッティン

グパラメータに従ってX線散乱曲線または粒子線散乱曲線を表す散乱関数を記憶する関数記憶手段と、関数記憶手段からの散乱関数を用いることにより実測X線散乱曲線または実測粒子線散乱曲線の測定条件と同じ条件にてシミュレートX線散乱曲線またはシミュレート粒子線散乱曲線を算出するシミュレート手段と、フィッティングパラメータを変更しながらシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティング、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線とのフィッティングを行うフィッティング手段と、を有しており、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とが一致したときのフィッティングパラメータの値、またはシミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線とが一致したときのフィッティングパラメータの値を、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態とすることを特徴とする密度不均一試料解析装置（請求項10）（請求項11）を提供し、この解析装置において、実測X線散乱曲線または実測粒子線散乱曲線を $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \text{オフセット角} \Delta\omega$ の条件、 θ_{in} を一定にして θ_{out} をスキャンする条件、 θ_{out} を一定にして θ_{in} をスキャンする条件のいずれかの条件で測定した場合に、シミュレート手段は、その測定条件と同じ条件にて散乱関数によりシミュレートX線散乱曲線またはシミュレート粒子線散乱曲線を算出すること（請求項12）や、散乱関数として、屈折、散乱、および反射のうちの少なくとも一つを考慮した吸収・照射面積補正、もしくは粒子状物相関関数、またはそれら両方を導入したものが関数記憶手段に記憶されていること（請求項13）などをも提供する。

【0009】さらにまた、この出願の発明は、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析するための密度不均一試料解析システムであって、密度不均一試料の実測X線散乱曲線を測定するX線測定装置または密度不均一試料の実測粒子線散乱曲線を測定する粒子線測定装置と、上記の密度不均一試料解析装置とを備えており、X線測定装置による実測X線散乱曲線または粒子線測定装置による実測粒子線散乱曲線および散乱関数の計算に必要な測定時の各種パラメータが密度不均一試料解析装置によって使用可能となっていることを特徴とする密度不均一試料解析システム（請求項16）（請求項17）をも提供する。

【0010】さらにまた、この出願の発明は、密度不均一試料内の粒子状物の分布状態を解析する密度不均一試料解析方法であって、密度不均一試料がポーラス膜である場合に、X線散乱曲線の測定結果を用いて、ポーラス膜内の粒子状物の分布状態を解析することを特徴とする密度不均一解析方法（請求項18）をも提供する。

【0011】なお、上記の各解析方法、解析装置および解析システムでは、密度不均一試料としての薄膜またはバルク体を解析対象とすることができ（請求項8）（請求項14）、薄膜の一例としてはポーラス膜を挙げるこ

とができる。ポーラス膜の場合、粒子状物はポーラス膜を形成する微粒子あるいは空孔となる（請求項15）。

【0012】

【発明の実施の形態】以下に、上記のとおりこの出願の発明の一実施形態について、図1に沿って説明する。図1は、この出願の発明の密度不均一試料解析方法の解析手順の一例を示したフローチャートである。なお、ここではX線を用いた場合の解析方法を主として説明する。

【0013】＜ステップs1, s2＞ この出願の発明では、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線を表す散乱関数を用いて、シミュレートX線散乱曲線の算出を行うのであるが、この散乱関数としては、たとえば後述するように、粒子状物を球型モデルによりモデル化した場合の平均粒径および分布広がりを示すフィッティングパラメータ[R₀, M]を用いたものや、粒子状物を円筒型モデルによりモデル化した場合の直径およびアスペクト比を示すフィッティングパラメータ[D, a]を用いたものや、粒子状物の最近接距離および相関係数を示すフィッティングパラメータ[L, η]を用いたものや、粒子状物の含有率および相関距離を示すフィッティングパラメータ[P, ε]を用いたものがある。

【0014】いずれの散乱関数においても、X線反射率曲線やX線散乱曲線、およびその曲線から導出される各種値を必要とするので、まずシミュレーションおよびフィッティングの前に、粒子状物が分布した薄膜やバルク体などの密度不均一試料のX線反射率曲線およびX線散乱曲線の測定を行う。

【0015】＜ステップs1＞ X線反射率曲線は、X線入射角θ_{in}=X線出射角θ_{out}の条件（つまり鏡面反射）にて測定する。ここで、X線入射角θ_{in}とは密度不均一試料表面でのX線入射角度、X線出射角θ_{out}とは密度不均一試料表面でのX線出射角度である。

【0016】＜ステップs2＞ X線散乱曲線は、たとえば、X線入射角θ_{in}=X線出射角θ_{out}+オフセットΔωの条件、もしくはX線入射角θ_{in}=X線出射角θ_{out}+オフセットΔωの条件、またはそれら両条件にて測定する（以下、これらの条件を総称してθ_{in}=θ_{out}±Δωと呼ぶ）。ここで、オフセットΔωとはθ_{in}とθ_{out}との差角度である。Δω=0°の場合はθ_{in}=θ_{out}であり、鏡面反射となってX線反射率の測定と同じこととなる。X線散乱曲線の測定は、このΔωが0°から僅かにズレた（オフセットした）条件において行なう。Δωは、0°になるべく近く、且つΔω=0°時の強い鏡面反射の影響がなるべく少なくなる数値が望ましい。

【0017】θ_{in}=θ_{out}±ΔωでのX線散乱曲線の測定は散漫散乱の測定にはかならず、この散漫散乱は

薄膜やバルク体内の粒子状物の存在に起因するもの、つまり密度不均一試料の密度不均一性によるものであるため、この実測X線散乱曲線と後述の各種関数により算出されるシミュレーション散乱曲線とのフィッティングを行なうことで、薄膜やバルク体などの密度不均一試料の密度不均一性を的確に解析することができる。

【0018】また、X線散乱曲線は、X線入射角θ_{in}を一定にしてX線出射角θ_{out}をスキャンする条件、あるいはその逆にX線出射角θ_{out}を一定にしてX線入射角θ_{in}をスキャンする条件にて測定してもよい。この場合でも、高精度なシミュレーションおよびフィッティングに必要な散漫散乱の測定を的確に行うことができる。

【0019】＜ステップs3＞ 後述の各散乱関数では密度不均一試料の臨界角θ_cを用いるので、測定したX線反射率曲線から直接、臨界角θ_cを求めておく。X線反射率曲線からの臨界角θ_cの決定は公知の方法で行なうことができる。具体的には、X線反射率曲線において反射率（反射X線強度）が急激に低下する角度が臨界角θ_cとなる。なお、臨界角θ_cと数値δと屈折率nとの間にはθ_c=√(2δ)、n=1-δの関係がある。

【0020】一方、密度不均一試料を構成する元素が分かれば、δから密度不均一試料の平均密度ρを決めることもできる。より具体的には、構成元素jの組成比c_j、質量数M_j、原子散乱因子f_jが分かれば、次式により、密度不均一試料の平均密度ρが求まる。

【0021】

【数1】

$$\delta = \frac{r_e}{2\pi} \lambda^2 N_A \cdot \rho \cdot \frac{\sum_j c_j \text{Re}(f_j)}{\sum_j c_j M_j}$$

r_e : 古典電子半径 = 2.818 × 10⁻¹³ cm

N_A : アボガドロ数 = 6.022 × 10²³ mol⁻¹

ρ : 密度不均一試料の平均密度

c_j : 密度不均一試料中の元素jの組成比

M_j : 密度不均一試料中の元素jの原子量

f_j : 密度不均一試料中の元素jの原子散乱因子

【0022】算出に必要な各数値は密度不均一試料の作製時に予測することができる。この密度不均一試料の平均密度ρは、後述するように求められる密度不均一試料内の粒子状物の粒径や分布広がりなどの分布状態とともに、密度不均一試料の評価・作製において極めて有効な情報である。

【0023】＜ステップs4＞さて、以上のようにシミュレーションおよびフィッティングの前準備を終えた後、この出願の発明では、粒子状物の分布状態を示す

フィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線を表す散乱関数を用いることにより、フィッティングパラメータの数値を任意に選択し、散乱曲線の測定条件と同じ条件（ $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \Delta\omega$ 、 θ_{in} 一定・ θ_{out} スキャン、あるいは θ_{out} 一定・ θ_{in} スキャン）にてシミュレートX線散乱曲線の算出を行う。

＊【0024】より具体的には、まず下記の数2は散乱関数の一例を示したものであり、鏡面反射 $\theta_{in} = \theta_{out}$ を除くすべての θ_{in} 、 θ_{out} におけるX線散乱曲線を表したものとなっている。

【0025】

＊【数2】

$$I(\theta_{in}, \theta_{out}) = \int |F_s(q; \{p\})|^2 P(\{p\}) d\{p\}$$

$$q = \frac{4\pi \sin \left(\frac{\sqrt{\theta_{in}^2 - 2\delta} + \sqrt{\theta_{out}^2 - 2\delta}}{2} \right)}{\lambda}$$

$I(\theta_{in}, \theta_{out})$: 散乱関数

$F_s(q; \{p\})$: 密度不均一散乱形状因子

$q = |q|$: 散乱ベクトルの大きさ

q : 散乱ベクトル

$\theta_c = \sqrt{2\delta}$: 臨界角

$n = 1 - \delta$: 屈折率

λ : X線波長

$P(\{p\})$: 密度不均一分布関数

$\{p\}$: 分布関数のパラメータの組

【0026】この数2で与えられる散乱関数においては、密度不均一散乱形状因子がX線散乱曲線を表す重要要素となっている。密度不均一散乱形状因子とは、密度不均一試料内の粒子状物の形状をある特定の形状モデルで表し、その形状モデルが試料内にてある状態で分布していることを表すものであり、この因子に従って、粒子状物の分布による影響を的確にとらえたX線散乱曲線を自由度高く、且つ高精度でシミュレートできるのである。なお、密度不均一分布関数を定める $\{p\}$ は、いくつかの分布関数を定めるパラメータの組があっても良いことを表している。

【0027】粒子状物の形状モデルとしては、たとえば図2(a)に例示した球型モデルおよび図2(b)に例示した円筒型モデルが考えられ、それらを解析対象に応じて任意に選択することで、あらゆる粒子状物の形状をモデル化できる。

【0028】まず、球型モデルを用いた散乱関数 $I(q)$ は、たとえば下記の数3で与えられ、そのうちの粒径分布を表す粒径分布関数は数4、粒子形状を表す粒子形状因子は数5で与えられる。なお数3は、数4および数5を用いてたとえば下記の数6のように展開できる。この場合、球型モデルでモデル化した粒子状物の平均粒径および分布広がりを示すパラメータ $[R_o, M]$ が、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータであり、数3または数6の散乱関数 $I(q)$ は、これらフィッティングパラメータに従って、つまり $[R_o, M]$ の数値を任意に選択することで、様々な分布状態を

表すことができ、その分布状態により影響を受ける様々なX線散乱曲線を表す関数となっている。

【0029】

【数3】

$$I(q) = \int_0^\infty dR \cdot |\Omega^{FT}(q, R)|^2 \cdot P_{R_o}^M(R) \cdot \frac{1}{R^3} R_o^3 \rho_o$$

$P_{R_o}^M(R)$: 粒径分布関数

R_o : 平均粒径パラメータ

M : 分布広がりパラメータ

R : 積分変数

$q = |q|$: 散乱ベクトルの大きさ

q : 散乱ベクトル

ρ_o : 粒子状物の平均密度

$\Omega^{FT}(q, R)$: 粒子形状因子

【0030】

【数4】

$$P_{R_o}^M(R) = \frac{\left(\frac{M}{R_o}\right)^M}{\Gamma(M)} \cdot e^{-\frac{MR}{R_o}} \cdot R^{M-1}$$

$\Gamma(M)$: Γ 関数

【0031】

【数5】

$$\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{q}, \mathbf{R}) = \frac{4\pi R^3}{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R})^3} [\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) - (\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \cdot \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R})]$$

【0032】

* * 【数6】

$$I(\mathbf{q}) = \frac{8\pi^2 \left(1 + \frac{4q^2 R^2}{M^2}\right)^{-\frac{1+M}{2}}}{(-3+M)(-2+M)(-1+M)q^6} \left\{ \begin{aligned} & M^3 \left(1 + \frac{4q^2 R^2}{M^2}\right)^{-\frac{1+M}{2}} \left[\left(1 + \frac{4q^2 R^2}{M^2}\right)^{-\frac{1+M}{2}} - \cos \left[(-3+M) \tan^{-1} \left(\frac{2qR}{M} \right) \right] \right] \\ & + (-3+M)(-2+M)M \cdot q^2 \cdot R^2 \left[\left(1 + \frac{4q^2 R^2}{M^2}\right)^{-\frac{1+M}{2}} + \cos \left[(-1+M) \tan^{-1} \left(\frac{2qR}{M} \right) \right] \right] \\ & - 2(-3+M)M^2 \cdot q \cdot R \cdot \left(1 + \frac{4q^2 R^2}{M^2}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \left[(-2+M) \tan^{-1} \left(\frac{2qR}{M} \right) \right] \end{aligned} \right\}$$

【0033】上記数4の式は粒径分布としてのガンマ分布を表した場合のものであるが、もちろん、ガンマ分布以外の粒径分布（たとえばガウス分布など）を表す粒径分布関数を用いてもよいことは言うまでもなく、シミュレート散乱曲線と実測散乱曲線との高精度フィッティングが実現されるように、任意に選択することが好ましい。

【0034】次に、円筒型モデルを用いた散乱関数 $I(\mathbf{q})$ であるが、これはたとえば下記の数7で与えられ※

※る。この場合、円筒型モデルでモデル化した粒子状物の直径およびアスペクト比を示すパラメータ $[D, a]$ が、分布広がりパラメータ $[M]$ とともに、粒子状物の分布状態を示すフィッティングパラメータとなっており、数7の散乱関数 $I(\mathbf{q})$ は、 $[D, a, M]$ の数値を任意に選択することで、様々な分布状態により影響を受けるX線散乱曲線を表す関数となっている。

【0035】

【数7】

$$I(\mathbf{q}) = \frac{2\pi^2 \rho_0}{q^6} \left(\frac{qD_0}{2} \right)^3 \cdot \frac{\left(\frac{M}{qD_0} \right)^M}{\Gamma(M)} \cdot \int_0^\infty dx \cdot x^{M+2} F(a, x) e^{-\frac{M}{qD_0} x}$$

$$F(a, qD) = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left| \frac{\sin \left(\frac{a \cdot qD}{2} \cos \theta \right) J_1 \left(\frac{qD}{2} \sin \theta \right)}{\left(\frac{qD}{2} \right)^2 \sin \theta \cos \theta} \right|^2$$

D : 直径パラメータ
 a : アスペクト比パラメータ
 M : 分布広がりパラメータ
 q : 散乱ベクトル
 $\Gamma(M)$: Γ 関数
 $J_1(z)$: ベッセル関数

【0036】また、上記各式において用いられている散乱ベクトル q は、粒子状物による屈折効果を考慮したものとになっている。薄膜状態の試料においては表面における入射X線の屈折効果が測定散乱曲線に重要な影響を及ぼしており、この屈折効果を考慮したシミュレーションを行なうことが高精度な密度不均一解析の実現に必要と

なる。そこでこの出願の発明では、数2で与えられるような屈折効果を的確に考慮した散乱ベクトル q を用いて、シミュレーションに最適な散乱関数としている。より具体的には、一般には散乱ベクトル $q = (4\pi \sin \theta_s) / \lambda$ であるが、薄膜状態の場合、粒子状物によるX線散乱の散乱角 $2\theta_s$ と θ_{in} および θ_{out} との間

に、

【0037】

【数8】

$$2\theta_c = \sqrt{\theta_{out}^2 - 2\delta} + \sqrt{\theta_{in}^2 - 2\delta}$$

【0038】で表される関係があると考え、これを一般式に導入している。X線反射曲線から取得した臨界角 θ_c は、この散乱ベクトル q において利用される($\theta_c = \sqrt{2\delta}$)。

【0039】以上のように、数3～数6あるいは数7を任意に選択して用いる散乱関数は、精密に粒子状物による影響を考慮して、フィッティングパラメータとしての平均粒径パラメータ R_o 、分布広がりパラメータ M 、直径パラメータ D 、アスペクト比パラメータ a に従った様々な散乱曲線をシミュレートするものとなっている。したがって、後述するように各パラメータ $[R_o, M]$ または $[D, a, M]$ の数値を最適化することで、実測散乱曲線に極めて一致するシミュレート散乱曲線を算出できる。

【0040】なお、数2において、粒子状物を構成する原子の構造因子を考慮することは当然である。また、数2～数7においては、厳密には散乱ベクトル q ではなく、その大きさ $|q|$ が用いられている。これは、一般的にはベクトル q で扱うのだが、上記各式では、粒子状物がランダムな方位を持つとして、等方性(方向に依存しない)を仮定したためである。

【0041】さて、上記散乱関数によるシミュレートX線散乱曲線の算出についてさらに説明すると、まず、実際の散乱曲線の測定時と同じ条件に設定して、球型モデルによる散乱関数(数3～数6)を選択した場合には平均粒径パラメータ R_o 、分布広がりパラメータ M の数値、円筒型モデルによる散乱関数(数7)を選択した場合には直径パラメータ D 、アスペクト比パラメータ a 、分布広がりパラメータ M の数値を任意に選択する。そして*

$$I(\theta_{in}, \theta_{out}) = A \cdot I(q) \cdot S(q)$$

$$q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \left[\frac{\sqrt{\theta_{in}^2 - 2\delta} + \sqrt{\theta_{out}^2 - 2\delta}}{2} \right]$$

$I(\theta_{in}, \theta_{out})$: 散乱関数

$q = |q|$: 散乱ベクトルの大きさ

q : 散乱ベクトル

$\theta_c = \sqrt{2\delta}$: 臨界角

$n = 1 - \delta$: 屈折率

λ : X線波長

【0046】この散乱関数において、 A が吸収・照射面積補正であり、 $S(q)$ が粒子状物相関関数である。も

*て、数8を適用することにより、 $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \Delta\omega$ 、 θ_{in} 一定・ θ_{out} スキャン、または θ_{out} 一定・ θ_{in} スキャンの条件における選択値 $[R_o, M]$ または $[D, a, M]$ のときのX線散乱曲線が得られる。

【0042】より具体的には、この算出に必要な各種パラメータは、上記数2～数7でわかるように、 R_o 、 M 、 D 、 a 、 q 、 θ_{in} 、 θ_{out} 、 δ 、 λ 、 ρ_o である。これらパラメータのうち、 δ 、 ρ_o は反射率曲線から得られ、 q は θ_{in} 、 θ_{out} 、 δ 、 λ から算出でき、 R_o 、 M 、 D 、 a はフィッティングパラメータである。したがって、シミュレーションにおいては、反射率曲線を測定するだけで、後は散乱関数を計算すれば、簡単に短時間で、シミュレートX線散乱曲線を得ることができる。

【0043】ところで、粒子状物の分布は密度不均一試料から得られる散乱曲線に多大な影響を及ぼすことは既に述べた通りであり、数2の散乱関数は散乱ベクトルや密度不均一散乱形状因子などによってその影響を考慮したものとなされ、高精度なシミュレート散乱曲線の取得を実現している。しかしながら、粒子状物による影響はより多種多様なものであり、たとえば試料内に入射したX線の屈折率、吸収効果、照射面積なども影響を受ける。粒子状物相互の相関状態も散乱曲線に影響を及ぼす一要因である。

【0044】そこで、この出願の発明では、密度不均一試料によるこれら様々な影響を考慮することで、より精密なフィッティングを実現し、解析精度をより一層向上させるべく、たとえば上述した散乱関数に「屈折等を考慮した吸収・照射面積補正」(以下、吸収・照射面積補正と略称する)や「粒子状物相関関数」を導入したものをを用いるようにしてもよい。この場合の散乱関数は、たとえば次式のように与えられる。

【0045】

【数9】

もちろんこの場合においても $I(q)$ として上述した球型モデルおよび円筒型モデルによるものを任意に選択する

ことができる。

【0047】まず、吸収・照射面積補正 A について説明する。図3は、基板（屈折率 n_2 ）上に成膜された密度不均一薄膜（屈折率 n_1 ）におけるX線の様子を例示したものである。この図3に例示したように、粒子状物が内在する密度不均一薄膜では、膜表面から出射するX線として、①膜内の粒子状物により膜表面方向へ散乱した後、膜表面にてある程度屈折して出射するもの、②膜内の粒子状物により基板との界面方向へ散乱した後、界面にて膜表面方向へ反射し、膜表面にてある程度屈折して出射するもの、③界面にて膜表面方向へ反射し、膜表面に到達する前に粒子状物により散乱して、膜表面からある程度屈折して出射するもの、が考えられる。また、①～③において、一部が膜表面にて膜内へ反射して戻され、残りが膜表面から出射する場合もある（①'、②'、③'）。

【0048】したがって、これら①～③および①'～③'の通りのX線の屈折・反射・散乱様子を考慮した吸収・照射面積補正 A を導入することで、薄膜状態の試料内における粒子状物をよりの確に考慮した散乱関数を実現できる。

【0049】①を考慮した吸収・照射面積補正 A_1 は、たとえば数10で与えられる。

【0050】

$$A_1 = A_1$$

$$\left\{ (1 - R_{01}(\theta_{in})) \cdot \frac{\theta_{in}}{\sqrt{\theta_{in}^2 - \theta_c^2}} \cdot \frac{\theta_{out}}{\sqrt{\theta_{out}^2 - \theta_c^2}} \cdot (1 - R_{10}(\theta_{out})) \right\}$$

【0054】②を考慮した吸収・照射面積補正 A_2 は、たとえば数12で与えられる。

【0055】

【数12】

$$A_2 = \frac{d}{\sin \theta_{in}} \cdot e^{-\frac{2\mu d}{\sin \theta_{out}}} \cdot R_{12}(\theta_{out})$$

$$A_2 = A_2$$

$$\left\{ (1 - R_{01}) \cdot \frac{\theta_{out}}{\sqrt{\theta_{out}^2 - \theta_c^2}} \cdot \frac{\theta_{in}}{\sqrt{\theta_{in}^2 - \theta_c^2}} \cdot (1 - R_{10}) \right\}$$

【0058】③を考慮した吸収・照射面積補正 A_3 は、たとえば数14で与えられる。

【0059】

【数14】

$$A_3 = \frac{d}{\sin \theta_{in}} \cdot e^{-\frac{2\mu d}{\sin \theta_{in}}} \cdot R_{12}(\theta_{in})$$

*【数10】

$$A_1 = \frac{d}{\sin \theta_{in}} \cdot \frac{1 - e^{-\left(\frac{1}{\sin \theta'_{in}} + \frac{1}{\sin \theta'_{out}}\right)\mu d}}{\left(\frac{1}{\sin \theta'_{in}} + \frac{1}{\sin \theta'_{out}}\right)\mu d}$$

$$\theta'_{in} = \sqrt{\theta_{in}^2 - 2\delta}$$

$$\theta'_{out} = \sqrt{\theta_{out}^2 - 2\delta}$$

μ : 吸収係数

d : 薄膜の厚さ

【0051】この吸収・照射面積補正 A_1 では、屈折補正として $\theta_{in}' = \sqrt{(\theta_{in})^2 - 2\delta}$ 、照射面積補正として $d/\sin \theta_{in}$ 、吸収効果補正として $(1 - e^{-\dots})/(\dots)$ が考慮されている（***は数10において対応する $(1/\sin \theta'_{in} + 1/\sin \theta'_{out})\mu d$ を示す）。

【0052】①'を考慮した吸収・照射面積補正 A_1' は、たとえば数11で与えられる。

【0053】

【数11】

*

30※【0056】②'を考慮した吸収・照射面積補正 A_2' は、たとえば数13で与えられる。

は、たとえば数13で与えられる。

【0057】

【数13】

※

【0060】③'を考慮した吸収・照射面積補正 A_3' は、たとえば数15で与えられる。

【0061】

【数15】

$$A_3 = A_3$$

$$\left\{ (1 - R_{01}) \cdot \frac{\theta_{out}}{\sqrt{\theta_{out}^2 - \theta_c^2}} \cdot \frac{\theta_{in}}{\sqrt{\theta_{in}^2 - \theta_c^2}} \cdot (1 - R_{10}) \right\}$$

【0062】なお、数12～数15では、 q は数16となる。

【0063】

【数16】

$$q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \left[\frac{\sqrt{\theta_{in}^2 - 2\delta} - \sqrt{\theta_{out}^2 - 2\delta}}{2} \right]$$

10

*【0064】以上の数10～数15を数9における吸収・照射面積補正 A とすればよい。また、数10～数15は解析対象となる薄膜に対応させて様々に組み合わせて用いることもできる。数17は、その一例であり、上段は数10、12、14、下段は数11、13、15を一度に考慮したものである。

【0065】

*【数17】

$$I(\theta_{in}, \theta_{out}) = A_1 \cdot I(q) \cdot S(q) + A_2 \cdot I(q) \cdot S(q) + A_3 \cdot I(q) \cdot S(q)$$

$$I(\theta_{in}, \theta_{out}) = A_1 \cdot I(q) \cdot S(q) + A_2 \cdot I(q) \cdot S(q) + A_3 \cdot I(q) \cdot S(q)$$

【0066】さらにまた、当然に、X線は膜表面にても散乱するので、その散乱X線（図2中の④）についての補正を行っても良い。この場合の補正は、公知の数式（たとえば、S.K.sinha, E.B.Sirota, and S.Garoff, "X-ray and neutron scattering from rough surfaces," Physical Review B, vol.38, no.4, pp.2297-2311, August 1988.におけるEq.(4.41))に従って行うことができる。

【0067】なお、上記①～④のうち、①はバルク体においても同様に発生し得るので、上記数10の数式による吸収・照射面積補正は密度不均一バルク体の解析にも用いることができ、解析精度のさらなる向上を図ることができる。この場合、数10における薄膜の厚さ d はバルク体の厚さ d となる。

【0068】次いで、粒子状物相関関数 $S(q)$ について説明すると、これは粒子状物相互の相関を表す関数であり、たとえば次式をその一例とすることができる。

【0069】

【数18】

$$S(q) = 1 + \int d\mathbf{r} (n(\mathbf{r}) - n_0) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

$n(\mathbf{r})$: 粒子状物の密度分布関数

n_0 : 粒子状物の平均数密度

\mathbf{q} : 散乱ベクトル

\mathbf{r} : 空間座標

【0070】実際のシミュレーションでは、数18で与えられる粒子状物相関関数 $S(q)$ においては、粒子状物の密度分布関数 $n(r)$ として、分布状態を表し得るある適当な具体的モデルを用いる必要がある。

【0071】たとえば、具体的モデルの一例として粒子状物が相互に最近接距離 L および相関係数 η で分布している場合を想定し、これら L および η をフィッティングパラメータとする。この場合の粒子状物相関関数 $S(q)$ は、たとえば次式のように与えられる。

【0072】

【数19】

30

$$S(q) = \frac{1}{1-C(q)}$$

$$C(q) = \frac{24\eta}{(1-\eta)^2(q \cdot L)^3} \left[\begin{aligned} & (1+2\eta)^2 \left(\frac{\sin(q \cdot L)}{-q \cdot L \cos(q \cdot L)} \right) \\ & - 6\eta \left(1 + \frac{\eta}{2} \right)^2 \left(\frac{2\sin(q \cdot L)}{-q \cdot L \cos(q \cdot L)} - \frac{2(1-\cos(q \cdot L))}{q \cdot L} \right) \\ & + \frac{1}{2}\eta(1+2\eta)^2 \left\{ \left(4 - \frac{24}{(q \cdot L)^2} \right) \sin(q \cdot L) \right. \\ & \quad \left. - \left(q \cdot L - \frac{12}{q \cdot L} \right) \cos(q \cdot L) \right\} \\ & \quad \left. + \frac{24(1-\cos(q \cdot L))}{(q \cdot L)^3} \right] \end{aligned} \right]$$

L: 粒子間最近接距離パラメータ

η : 粒子間相関係数(packing density)パラメータ

【0073】この数19の粒子状物相関関数を組み込んだ数9の散乱関数の場合では、シミュレートX線散乱曲線の算出に必要な各種パラメータは、 R_o , M , a , M , q (θ_{in} , θ_{out} , λ , δ), ρ_o , μ , d , L , η である。前述の数2の場合から増えたパラメータは μ , d , L , η であるが、 μ および d は測定に用いる密度不均一試料から決定できる。 L および η は、 R_o , M , D , a と同様に、シミュレート散乱曲線と実測散乱曲線とのフィッティングを行うためのフィッティングパラメータであって、粒子状物相互の最近接距離および相関係数を示したものである。したがって、X線反射率曲線を測定し、平均粒径パラメータ R_o 、分布広がりパラメータ M 、直径パラメータ D 、アスペクト比パラメータ a 、粒子間最近接距離パラメータ L 、粒子間相関係数パラメータ η それぞれの数値を調整して、散乱関数を計算するだけで、より多種のX線散乱曲線を簡易にシミュレ

*ートできるのである。

【0074】なお、上述した散乱関数、密度不均一散乱形状因子、粒径分布関数、吸収・照射面積補正項、および粒子状物相関関数などの導出過程はそれぞれ多ステップに及ぶのでここでは省略するが、この出願の発明の一特徴は、各種フィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線をシミュレートする散乱関数を用いることにあり、たとえば上記の各数式を計算すれば、密度不均一性解析に必要なシミュレーションX線散乱曲線を得ることができるのである。

【0075】基本的には上記各数式(数2～数19)は、下記の数20で与えられる公知の基本散乱関数を、粒子状物の不均一分布を考慮した数21および数22を用いて展開していくことで得ることができる。

【0076】

【数20】

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int \rho(r) e^{-iq \cdot r} dr \int \rho(r) e^{iq \cdot r} dr$$

$\rho(r)$: 粒子状物の分布に伴う密度不均一試料内の電子密度分布

q : 散乱ベクトル

r : 空間座標

【0077】

【数21】

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \rho_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

\mathbf{R}_i : 粒子状物 i の位置

$\rho_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$: 粒子状物 i の電子密度分布

[0078]

[数22]

$$\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = \frac{\sum_i \rho_i(\mathbf{r})}{N}$$

$\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{q})$: 粒子形状因子

$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle$: 粒子状物の平均電子密度分布

N : 粒子状物の個数

$$N = \frac{S_o d}{\sin \theta_{in}} \cdot \frac{1 - e^{-\left(\frac{1}{\sin \theta'_{in}} + \frac{1}{\sin \theta'_{out}}\right) \mu d}}{\mu d \left(\frac{1}{\sin \theta'_{in}} + \frac{1}{\sin \theta'_{out}} \right)} \cdot \frac{1}{R_o^3}$$

$$S_o = L_x L_y$$

L_x : x方向の粒子間最近接距離

L_y : y方向の粒子間最近接距離

d : 試料の厚さ

[0081] もちろん上記各数式は一例であって、用いられている変数名や並びなどが上記のものに限定されないことは言うまでもない。たとえば、数3、数7および数9の散乱関数は、フィッティングパラメータとして $[R_o, M]$ 、 $[D, a, M]$ 、 $[L, n]$ を用いたものとなっているが、この他にも、たとえば、粒子状物の※

30※ 含有率および相関距離を示したフィッティングパラメータに従ってX線散乱曲線を表す散乱関数を用いることができる。この場合の散乱関数は、たとえば下記の数24および数25で与えられる。

[0082]

[数24]

$$I(\theta_{in}, \theta_{out}) = |\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{q})|^2$$

$$q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \left[\frac{\sqrt{\theta_{in}^2 - 2\delta} + \sqrt{\theta_{out}^2 - 2\delta}}{2} \right]$$

$I(\theta_{in}, \theta_{out})$: 散乱関数

$\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{q})$: 密度不均一散乱形状因子

$q = |\mathbf{q}|$: 散乱ベクトルの大きさ

\mathbf{q} : 散乱ベクトル

$\theta_c = \sqrt{2\delta}$: 臨界角

$n = 1 - \delta$: 屈折率

λ : X線波長

[0083]

50 [数25]

$$\Omega^{\text{FT}}(q) = (\Delta\rho)^2 \frac{8\pi P(1-P)\xi^3}{(1+q^2\xi^2)^2}$$

$\Delta\rho$: 粒子状物とその他の試料構成物質との密度差

P : 粒子状物の含有率パラメータ

ξ : 粒子状物の相関距離パラメータ

【0084】密度不均一試料が後述するようなポーラス膜であり、粒子状物がそのポーラス膜を形成する微粒子あるいは空孔である場合（実施例2参照）では、数24における $\Delta\rho$ とは微粒子あるいは空孔とポーラス膜を構成するその他の物質（基板ではなく、膜自体を構成するもの）との密度差であり、 P とは微粒子率あるいは空孔率、 ξ とは微粒子あるいは空孔の相関距離となる。

【0085】この散乱関数を用いる場合、フィッティングパラメータとしての P および ξ を変更させながらシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティングを行う。

【0086】さらにまた、次のような散乱関数を用いることもできる。通常のX線回折計では、測角方向=ゴニオメータの回転方向については平行度良く測定できるが、それと直交する方向については大きな発散を持つ。これが小角散乱のプロファイルに影響を与えるため、ス*

$$\chi^2 = \sum_i (\log I_i(\text{exp}) - \log I_i(\text{cal}))^2$$

$I_i(\text{exp})$: i 番目の測定点の実測データ

$I_i(\text{cal})$: i 番目の測定点のシミュレートデータ

【0091】で求められる。

<ステップs6> そして、その一致度（あるいは差）が所定値または所定範囲内であれば両曲線は一致すると判断し、そうでなければ両曲線は一致しないと判断する。

【0092】<ステップs6No→ステップs4→ステップs5> 両極線が一致しないと判断した場合は、散乱関数における粒子状物の分布状態を表すフィッティングパラメータを変更して、再度、シミュレートX線散乱曲線を算出し、実測X線散乱曲線との一致を判断する。これを、両曲線が一致するまでフィッティングパラメータの数値を調整・変更しながら繰り返す。数3あるいは数7で与えられる散乱関数の場合には $[R_o, M]$ あるいは $[D, a]$ 、数19の粒子状物相関関数を組み込んだ数9で与えられる散乱関数の場合には $[R_o, M]$ あるいは $[D, a]$ に加えて $[L, \eta]$ 、数24で与えられる散乱関数の場合には $[P, \xi]$ の値を変更する。

【0093】<ステップs6Yes→ステップs7> そして、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とが一致したときのフィッティングパラメータの選択値が、解析対象である密度不均一試料内の粒子状物の分布

*リット長補正が必要となる。このスリット長補正を考慮した場合、スリット関数を $W(s)$ とすると、散乱関数 $I(q)$ に対して、測定される散乱関数 $I_{\text{obs}}(q)$ は、次式で与えられる。

【0087】

【数26】

$$I_{\text{obs}}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\sqrt{q^2 + s^2}) W(s) ds$$

【0088】したがって、上記の各散乱関数 $I(q)$ を数26の散乱関数 $I_{\text{obs}}(q)$ で置き換えればよい。図4は、スリット関数 $W(s)$ の一例を示した図である。もちろんこれは一例であって、スリット関数 $W(s)$ は適宜にX線回折計に合わせたものとする。

【0089】<ステップs5> さて、上述したように散乱関数を用いてシミュレートX線散乱曲線を算出した後は、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティングを行なう。このフィッティングでは、両曲線の一致度（あるいは両曲線の差）を検討する。たとえば、両曲線の差は、

【0090】

【数27】

30 状態を示す値となる。 $[R_o, M]$ の数値が粒子状物の平均粒径および分布広がり、 $[D, a, M]$ の数値が粒子状物の直径およびアスペクト比および分布広がり、 $[L, \eta]$ の数値が粒子状物相互の最近接距離および相関係数、 $[P, \xi]$ の数値が粒子状物の含有率および相関距離となる。

【0094】なお、このフィッティングにおいては、たとえば非線形最小二乗法を用いることにより、効率的に各フィッティングパラメータの最適値を求めることができる。

40 【0095】上述したように密度不均一性を考慮した各関数を用いていることで、シミュレートX線散乱曲線は実測X線散乱曲線との一致度が極めて高いものとなり、各フィッティングパラメータも実際の粒子状物の分布状態を極めて正確に表すこととなる。したがって、薄膜やバルク体の密度不均一性を極めて高精度で実現できるのである。

【0096】また、密度不均一試料に対する測定は反射率測定および散乱曲線測定だけなので、従来のガス吸着法のように、測定時間が長くなったり、ガスが薄膜内に侵入できるか否かというような薄膜種類の限定もなく、

また従来の小角散乱法のように、基板上に形成された薄膜に対しては基板から剥がすなどといった必要もない。したがって、様々な密度不均一薄膜に対して、もちろん様々な密度不均一バルク体に対しても、非破壊、且つ短時間で密度不均一性解析を実現することができる。

【0097】なお、以上は主にX線を用いた場合についての説明であるが、X線の場合と同様にして、中性子線や電子線等の粒子線を用いても密度不均一試料内の粒子状物の分布状態や密度不均一試料の平均密度を解析することができることは言うまでもない。前記の各散乱関数も粒子線の反射率曲線・散乱曲線に対してそのまま適用可能であり（「X線」を「粒子線」に置き換えて読めばよい）、シミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線との極めて正確な一致を実現し、密度不均一性の高精度解析を実現できる。

【0098】以上のこの出願の発明の密度不均一試料解析方法において、シミュレーションやフィッティングなどの計算ステップは、実際にはコンピュータ（汎用コンピュータや解析専用コンピュータなどの計算機）を用いて実行する。また、この出願の発明がさらに提供する密度不均一試料解析装置は、たとえば、汎用コンピュータを機能させるソフトウェア形態や、解析専用のコンピュータ（解析機器）形態あるいはそれに組み込まれるソフトウェア（プログラム）形態として実現できる。またさらに、この出願の発明の密度不均一試料解析システムは、X線・粒子線測定装置と、各種形態の密度不均一試料解析装置とを備えてなるものであり、両装置は双方向あるいは一方のデータ・信号送受可能に構築されている。

【0099】図5は、X線を用いた場合のこの出願の発明の密度不均一試料解析方法を実行して、密度不均一試料の粒子状物の平均粒径および分布広がり解析する密度不均一試料解析システムの一形態を示したブロック図である。

【0100】この図5に示した密度不均一試料解析システム（1）は、X線測定装置（2）および密度不均一試料解析装置（3）を備えている。X線測定装置（2）は、密度不均一試料のX線反射率曲線およびX線散乱曲線を測定するものである。密度不均一試料が薄膜試料である場合にはゴニオメータ（通常薄膜試料はその試料室に備えられる）などを用いることができ、X線入射角 θ_{in} 、X線出射角 θ_{out} 、散乱角 $2\theta = \theta_{in} + \theta_{out}$ を設定・スキャンすることにより測定する。前述と同様に（解析方法のステップs1&s2参照）、反射率曲線の測定は $\theta_{in} = \theta_{out}$ 、散乱曲線の測定は $\theta_{in} = \theta_{out} \pm \Delta\omega$ 、 θ_{in} 一定・ θ_{out} スキャン、または θ_{out} 一定・ θ_{in} スキャンの条件で行なわれる。

【0101】密度不均一試料解析装置（3）は、臨界角取得手段（31）、関数記憶手段（32）、シミュレ

ート手段（33）、フィッティング手段（34）を有している。

【0102】臨界角取得手段（31）は、X線測定装置（2）による測定X線反射率曲線および実測X線散乱曲線から、前述と同様にして（ステップs3参照）臨界角 θ_c を導出する。また、この臨界角 θ_c から δ を算出できるように構築されていてもよい。

【0103】関数記憶手段（32）は、基本的には前述した各散乱関数を記憶している。各散乱関数に用いられる前述したその他の式ももちろん記憶されている。シミュレート手段（33）は、関数記憶手段（32）からの散乱関数（必要なその他の関数を含む）、さらには臨界角取得手段（31）からの θ_c （もしくは δ ）を用いて、前述と同様にして（ステップs4参照）、各種フィッティングパラメータの値を選択し、シミュレートX線散乱曲線を算出する。

【0104】フィッティング手段（34）は、前述と同様にして（ステップs5参照）、シミュレート手段（33）からのシミュレートX線散乱曲線とX線測定装置（2）からの実測X線散乱曲線とをフィッティングする。

【0105】測定X線反射率・散乱曲線や θ_{in} ・ θ_{out} などのシミュレーションおよびフィッティングに必要なデータは、たとえば、X線測定装置（2）から密度不均一試料解析装置（3）へ、より具体的には各データに対応させて臨界角取得手段（31）、シミュレート手段（33）、フィッティング手段（34）へ自動送出されるようになっていたことが好ましい。もちろん手動入力も可能である。

【0106】前述したように、シミュレートX散乱曲線の算出に前記各数式を用いる場合、シミュレート手段（33）は、 θ_c （もしくは δ ）の他にも、 θ_{in} 、 θ_{out} 、 λ 、 μ 、 d 、 ρ_o などが必要となる。たとえば、 θ_{in} 、 θ_{out} （もしくは 2θ ）はX線測定装置（2）から自動送出により与え、また μ 、 λ 、 d 、 ρ_o は手動入力したり、予め記憶されていたり、別途算出されたりして与えることができる。密度不均一試料解析システム（1）あるいは密度不均一試料解析装置（3）には、このための入力手段、記憶手段、計算手段などが必要であり、これら各種手段とシミュレート手段（33）とがデータ送受可能に構築されることは言うまでもない。

【0107】そして、密度不均一試料解析装置（3）は、前述と同様に（ステップs6&s7参照）、フィッティング手段（34）によってシミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とが一致すると判断されるまで、シミュレート手段（33）によって各種フィッティングパラメータを変更しながらシミュレートX線散乱曲線の算出を繰り返す。両曲線が一致すると、フィッティングパラメータの数値が実際の粒子状物の分布状態として解

析される。

【0108】図5の例では、密度不均一試料解析装置(3)自体に出力手段(35)が、あるいは密度不均一試料解析システム(1)に出力手段(36)が備えられており、ディスプレイ、プリンタ、内蔵/別体記憶手段などのこれら出力手段(35)(36)を介して解析結果(平均粒径および分布広がり)が出力(表示や記憶を含む)されるようになっている。また、この密度不均一試料解析システム(1)または密度不均一試料解析装置(3)による解析結果を薄膜作製などに反映させるようにする場合、薄膜作製装置やその制御装置などに直接解析結果を送信可能な態様となってもよい。

【0109】上述した密度不均一試料解析装置(3)が、たとえば、汎用コンピュータあるいは解析専用コンピュータにて記憶・起動・作動可能なソフトウェア形態である場合には、上記各手段はそれぞれの機能を実行するプログラムとして実現される。また、たとえば、解析専用コンピュータ(解析機器)自体である場合には、上記各手段はそれぞれの機能を実行する算術論理回路(データの入出力・保存機能を含む)などとして実現できる。そして、密度不均一試料解析システム(1)において、各種形態の密度不均一試料解析装置(3)はX線測定装置(2)との間でデータ・信号送受可能に構築されることが好ましい。なお、シミュレート手段(33)によるフィッティングパラメータの最適値の選択では、シミュレート曲線と実測曲線との一致度が高くなるように(たとえば所定値に近づくように)、最小二乗法等を用いて自動的に選択する機能を付加することで、コンピュータ等により完全自動で解析を行なうことができる。もちろん、任意に手動入力可能となってもよい。

【0110】この出願の発明は、以上のとおりの特徴を持つものであるが、以下に添付した図面に沿って実施例を示し、さらに詳しくこの出願の発明の実施の形態について説明する。

【0111】

【実施例】【実施例1】一実施例としてこの出願の発明によりX線散乱曲線のシミュレーションを行ったので説明する。このシミュレーションでは、 $I(q)$ として球型モデルによる数6の散乱関数を用いてシミュレートX線散乱曲線を算出している。

【0112】図6および図7は、平均粒径パラメータ R_o および分布広がりパラメータ M のガンマ分布の算出例を示したものである。図6の各ガンマ分布は $R_o = 20$ [Å]に固定し、 $M = 1, 1.5, 2, 3, 5$ と選択した場合のものであり、図7の各ガンマ分布は $M = 2.0$ に固定し、 $R_o = 10, 20, 30, 40, 50$ [Å]と選択した場合のものである。横軸は R [Å]、縦軸は分布確率値である。これら図6および図7からも明らかなように、平均粒径パラメータ R_o および分布広がりパラメータ M の数値によって様々な粒径分布を得ることが

できるのがわかる。

【0113】次いで、図8および図9は、各々、さらに別の $[R_o, M]$ を選択して算出したシミュレートX線散乱曲線を例示したものである。図8の各曲線は $R_o = 20$ [Å]に固定し、 $M = 1.0, 2.0, 3.0, 5.0, 10$ と選択した場合のものであり、図9の各曲線ガンマ分布は $M = 3.0$ に固定し、 $R_o = 10, 20, 30, 50, 100$ [Å]と選択した場合のものである。横軸は散乱角 2θ [deg]、縦軸はX線強度 I [cps]である。また $\lambda = 1.54$ Åとした。

【0114】これら図8および図9から明らかなように、各ガンマ分布に対応して様々なシミュレートX線散乱曲線を算出できることがわかる。したがって、X線反射率曲線およびX線散乱曲線を測定し、平均粒径パラメータ R_o および分布広がりパラメータ M を調整してフィッティングを行なうだけで、様々な密度不均一試料内の粒子状物の平均粒径および分布広がり的高精度解析が可能である。数ナノメートルオーダー解析も実現できる。

【0115】もちろん、 $I(q)$ として円筒型モデルによる数7を用いてシミュレーションを行う場合でも、直径パラメータ D 、アスペクト比パラメータ a 、分布広がりパラメータ M によって、様々な密度不均一試料の密度不均一性を自由度高く、高精度で解析可能である。

【0116】【実施例2】ここでは、実際に密度不均一試料として薄膜試料であるポーラス膜を用意し、この出願の発明によってポーラス膜を形成する空孔の分布状態を解析したので、その結果について説明する。

【0117】近年の半導体集積回路の高集積化にともない、層間容量の増大に起因した動作遅延を抑制すべく、層間絶縁膜の低誘電率化に対する要求が極めて高くなってきており、その低誘電率化を進めるために、層間絶縁膜として、多数の微粒子あるいは空孔を有する膜が研究・開発されてきている。この膜がポーラス膜である。ポーラス膜は、空孔の分布に起因して極めて低い誘電率を有しており、半導体高集積化に至極有用である。なお、ポーラス膜には、無機薄膜や有機薄膜などの中に多数の微粒子または空孔が分散されたクローズド・ポーラス膜と、基板状に分散された微粒子間の空隙を空孔としたオープン・ポーラス膜とがある。

【0118】本実施例では、Si基板上の SiO_2 薄膜に空孔を分散させたポーラス膜を用意した。また、X線散乱曲線の測定条件は、 $\theta_{in} = \theta_{out} \pm 0.1^\circ$ とした。シミュレートX線散乱曲線の算出には、 $I(q)$ として球型モデルによる数6を組み込んだ数9の散乱関数を用い、粒径分布関数としては数5のガンマ分布を表したものの、吸収・照射面積補正 A としては数10で与えられるもの、粒子状物相関関数 $S(q)$ としては数19で与えられるものを用いた。

【0119】まず、図10は、X線反射率曲線およびX線散乱曲線の測定結果を例示したものである。横軸は2

θ/ω [°], 縦軸は強度 [cps] となっている。この図10に示されたX線反射率曲線において、X線強度が急激に低下する角度は約 0.138° であるので、それを臨界角 θ_c とした。もちろんこの臨界角 θ_c の判定はコンピュータによって可能である。

【0120】その他、数9の散乱関数に必要な各パラメータ値は以下のようにになっている。

$$2\theta = 0^\circ \sim 8^\circ$$

$$\rho = 0.91 \text{ g/cm}^3$$

$$\delta = 2.9156 \times 10^{-6}$$

$$\mu = 30 \text{ cm}^{-1}$$

$$d = 4200 \text{ \AA}$$

$$\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$$

図11は、算出された $\Delta\omega = 0 \pm 0.1^\circ$ のシミュレーションX線散乱曲線および実測X線散乱曲線を重ねて表示したものである。この図11から明らかなように、両曲線は極めて高い一致を示している。このときの平均粒径パラメータ R_o および分布広がりパラメータ M の最適値は $R_o = 10.5 \text{ \AA}$ および $M = 2.5$ であり、また、最近接距離パラメータ L および相関係数パラメータ η の最適値は $L = 30 \text{ \AA}$ および $\eta = 0.6$ であった。したがって、それら各値が、実際のポーラス膜の空孔の平均粒径、分布広がり、最近接距離、相関係数とみることができ。図12は、このようにして得られた空孔サイズの分布を示したものである。

【0121】【実施例3】ここでは、Si基板上のSiO₂薄膜に空孔を分散させたポーラス膜について、吸収・照射面積補正Aとして数10を組み込んだ数9の散乱関数（ケースA）、ならびに、吸収・照射面積補正Aとして数10～数15を一度に組み込んだ数17下段の散乱関数（ケースB）によりシミュレートX線散乱曲線を算出し、実測X線散乱曲線との一致度を比較した。なお、ケースA、Bとも、 $I(q)$ として数6の球型モデルによるもの、粒径分布関数としては数5のガンマ分布を表したものの、粒子状物相関関数 $S(q)$ としては数19のものをを用いている。また、X線散乱曲線の測定条件は、 $\theta_{in} = \theta_{out} = 0.1^\circ$ とした。

【0122】算出に必要な各パラメータ値は以下のようにになっている。

$$\theta_c = 0.145^\circ$$

$$2\theta = 0^\circ \sim 4^\circ$$

$$\rho = 0.98 \text{ g/cm}^3$$

$$\delta = 3.17 \times 10^{-6}$$

$$\mu = 33.7 \text{ cm}^{-1}$$

$$d = 6000 \text{ \AA}$$

$$\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$$

図13は、各シミュレートX線散乱曲線および実測X線散乱曲線を重ねて表示したものである。この図13から明らかなように、曲線の最初の部分において、実測曲線では小さな山ができていて、ケースAよりもケースB

の方がその山を的確にシミュレートできていることがわかる。したがって、数10のみにより散乱関数を補正するよりも数10～数15と一緒に加えた方が、すなわち前記図3における①、①'、②、②'、③、③'全てを考慮することで、粒子状物によるX線の様々な屈折、反射、散乱に適応した、より精密なフィッティングを実現し、解析精度が向上しているのである。なお、このときの平均粒径パラメータ R_o および分布広がりパラメータ M の最適値は $R_o = 18.5$ および $M = 1.9$ であった。

【0123】もちろん図3における①、①'、②、②'、③、③'、④は、解析対象となる試料に従って様々な組合せて任意に選択することができ、より自由度の高いシミュレーションを可能とし、より一層の精度向上を図ることができる。

【0124】【実施例4】ここでは、 $I(q)$ として円筒型モデルによる数7を組み込んだ数9の散乱関数を用い、シミュレートX線散乱曲線と実測X線散乱曲線とのフィッティングを試みた。各種パラメータ値は以下に示したとおりである。

$$\theta_{in} = \theta_{out} = 0.1^\circ$$

$$\theta_c = 0.145^\circ$$

$$2\theta = 0^\circ \sim 8^\circ$$

$$\rho = 0.98 \text{ g/cm}^3$$

$$\delta = 3.17 \times 10^{-6}$$

$$\mu = 33.7 \text{ cm}^{-1}$$

$$d = 3800 \text{ \AA}$$

$$\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$$

図14は、各シミュレートX線散乱曲線および実測X線散乱曲線を重ねて表示したものである。この図14から明らかなように、実測曲線との一致度が極めて高いシミュレート曲線ものとなっている。したがって、円筒型モデルにより空孔をモデル化して分布状態をシミュレートした場合でも、本実施例で用いたポーラス膜については正確な密度不均一性の解析が実現されている。なお、このときの直径パラメータ D は 11 \AA 、アスペクト比パラメータ a は2、分布広がりパラメータ M は2.9であった。

【0126】以上の実施例3～5から明らかなように、この出願の発明によれば、ポーラス膜における極めて正確な空孔の分布状態をナノメートルオーダーで解析できることがわかる。もちろん、数24の散乱関数を用いた場合には、このモデルが適切である場合は空孔率 P および相関距離 ξ を正確に解析できる。

【0127】もちろん、ポーラス膜だけでなく、様々な薄膜、あるいはバルク体に対しても、同様に高いフィッティング度を得られ、優れた密度不均一性の解析が可能であることは言うまでもない。

【0128】ところで、以上の各実施例はX線を用いた場合についてのものであるが、もちろん電子線や中性子

線等の粒子線を用いても、同様にして高精度解析を実現できる。この場合、図5に例示した密度不均一試料解析システム(1)において、X線測定装置(2)は、粒子線測定装置となって粒子線反射率曲線および粒子線散乱曲線を測定し、密度不均一試料解析装置(3)における各種手段(31)(33)(34)は、粒子線反射率曲線から臨界角などを導出し、シミュレート粒子線散乱曲線を算出し、シミュレート粒子線散乱曲線と実測粒子線散乱曲線のフィッティングを行うものとなる。前記関数式は粒子線の場合にも使用できるので関数記憶手段(32)はそのまま同じものを利用可能でもある。

【0129】この出願の発明は以上の例に限定されるものではなく、細部については様々な態様が可能であることは言うまでもない。

【0130】

【発明の効果】以上詳しく説明した通り、この出願の発明の密度不均一試料解析方法、密度不均一試料解析装置、密度不均一試料解析システムによって、薄膜やバルク体内の粒子状物の分布状態(平均粒径、分布広がり、最近接距離、相関係数、含有率、相関距離など)、さらには薄膜やバルク体の平均密度を、非破壊、短時間、高精度で解析することができ、密度不均一性の高精度な評価を実現できる。また、平均密度および密度不均一性を客観的、且つ的確に考慮した薄膜・バルク体の作製も実現できる。

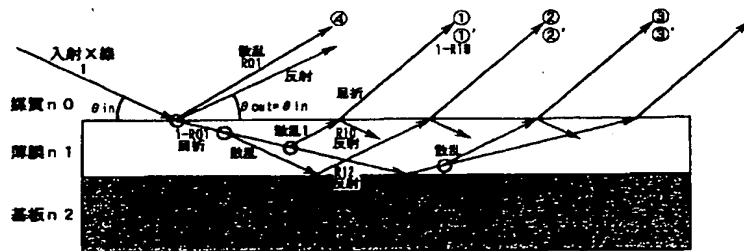
【図面の簡単な説明】

【図1】この出願の発明の密度不均一試料解析方法の解析手順の一例を示したフローチャートである。

【図2】(a)(b)は、各々、密度不均一形状因子における球型モデルおよび円筒型モデルを例示した図である。

【図3】密度不均一薄膜におけるX線の屈折、反射、散乱の様子を例示した図である。

【図3】



* 乱の様子を例示した図である。

【図4】スリット関数の一例を示した図である。

【図5】この出願の発明の密度不均一試料解析装置およびシステムを例示した要部ブロック図である。

【図6】ガンマ分布の一例を示した図である。

【図7】ガンマ分布の別の一例を示した図である。

【図8】シミュレートX線散乱曲線を例示した図である。

【図9】シミュレートX線散乱曲線を例示した図である。

【図10】一実施例としてのX線反射率曲線およびX線散乱曲線の測定結果を例示した図である。

【図11】一実施例としてのシミュレートX線散乱曲線および実測X線散乱曲線を重ねて表示した図である。

【図12】一実施例としてのポーラス膜の空孔サイズの分布を例示した図である。

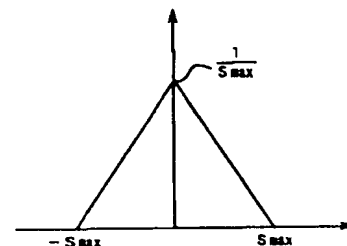
【図13】別の一実施例としてのシミュレートX線散乱曲線および実測X線散乱曲線を重ねて表示した図である。

【図14】さらに別の一実施例としてのシミュレートX線散乱曲線および実測X線散乱曲線を重ねて表示した図である。

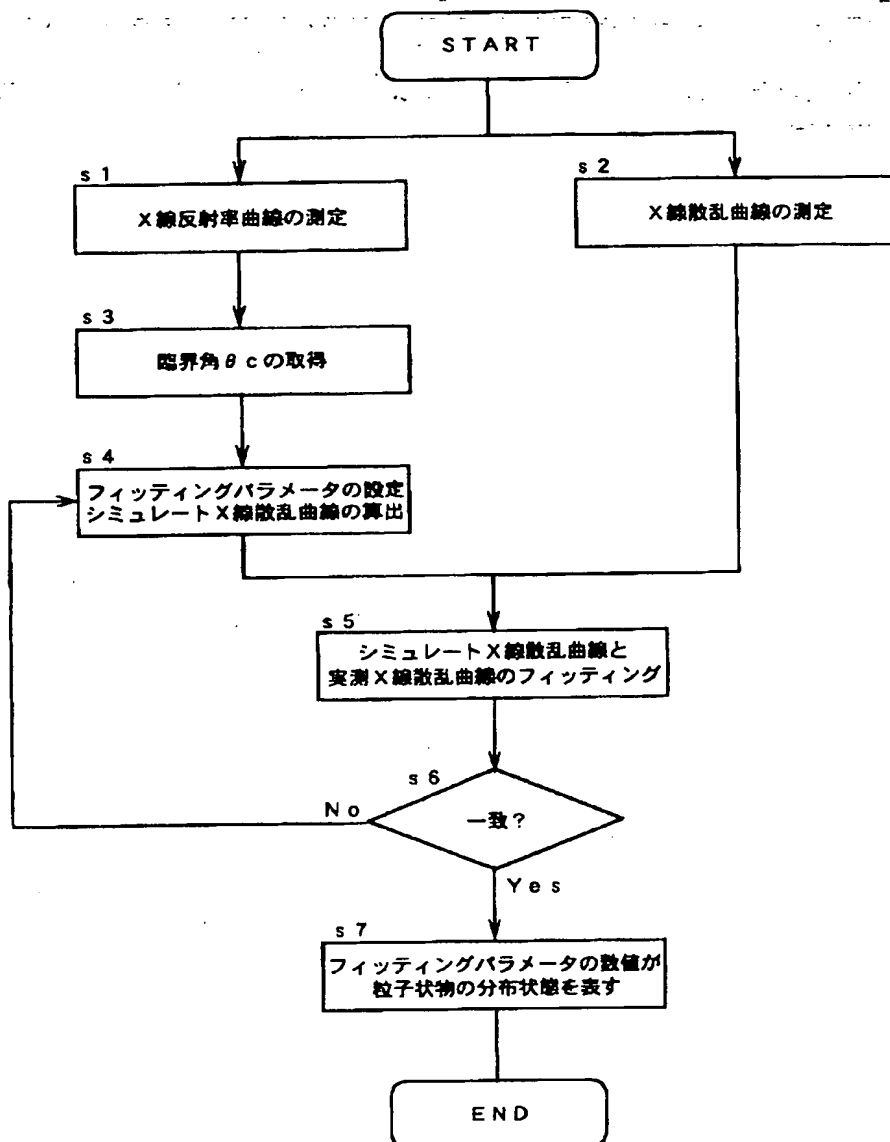
【符号の説明】

- 1 密度不均一試料解析システム
- 2 X線測定装置
- 3 密度不均一試料解析装置
- 31 臨界角取得手段
- 32 関数記憶手段
- 33 シミュレート手段
- 34 フィッティング手段
- 35, 36 出力手段

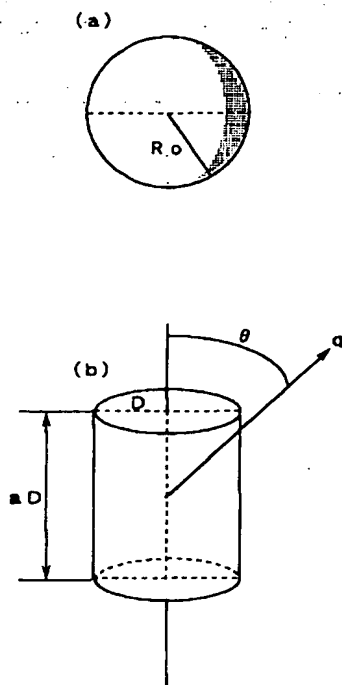
【図4】



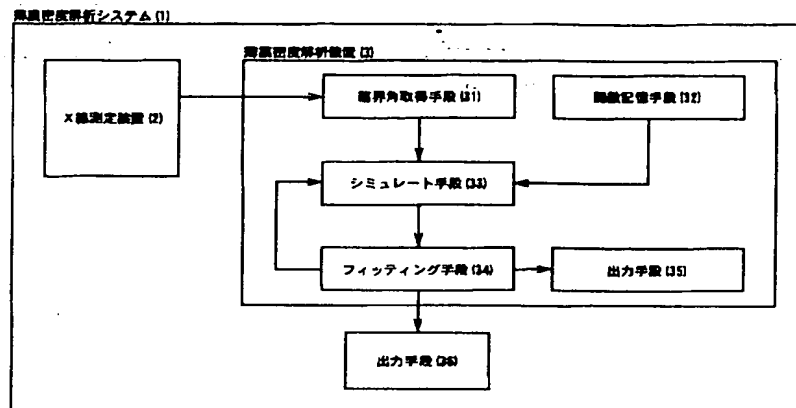
【図1】



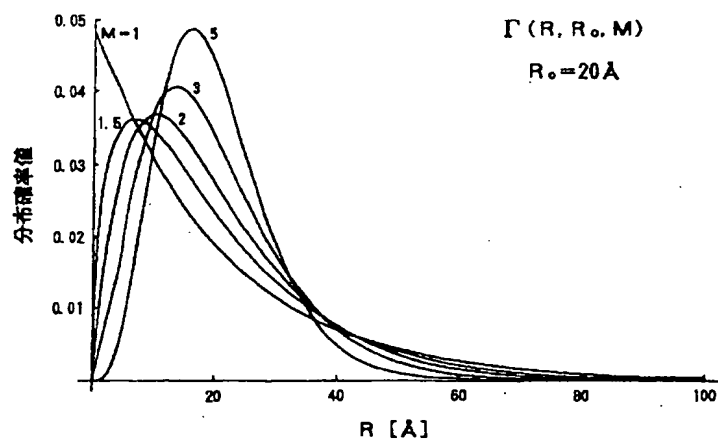
【図2】



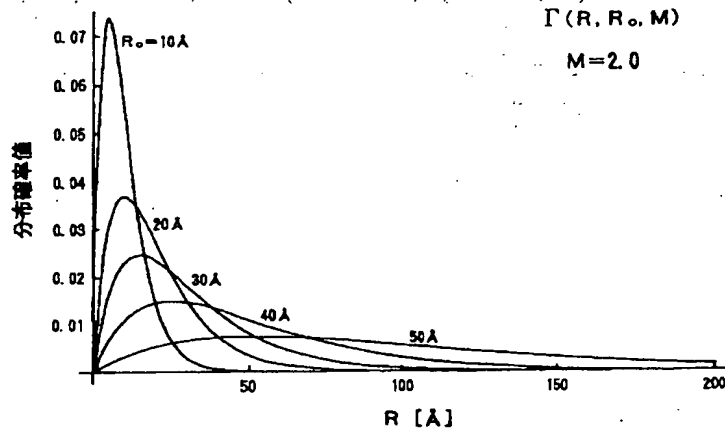
【図5】



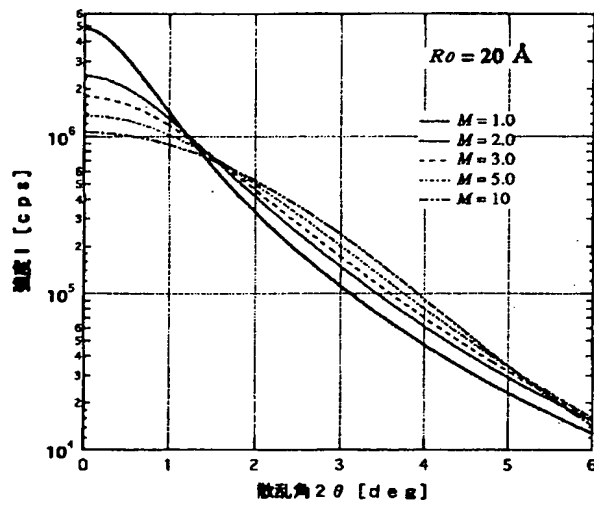
【図6】



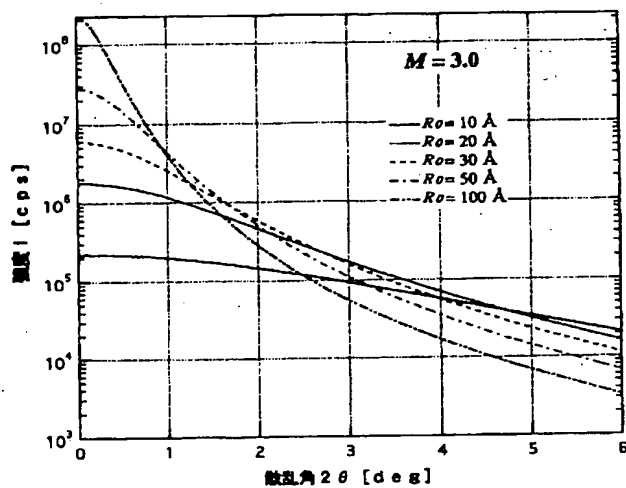
【図7】



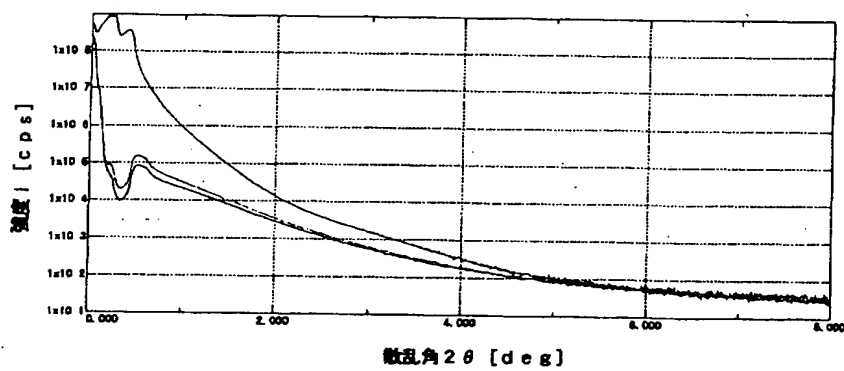
【図8】



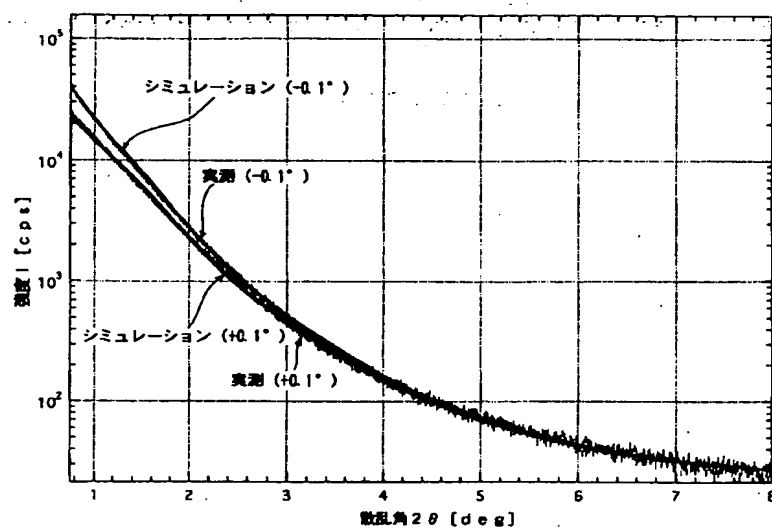
(図9)



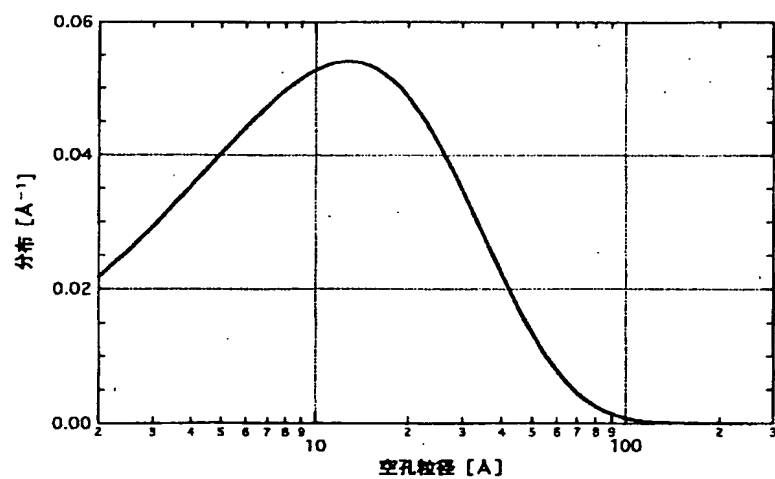
(図10)



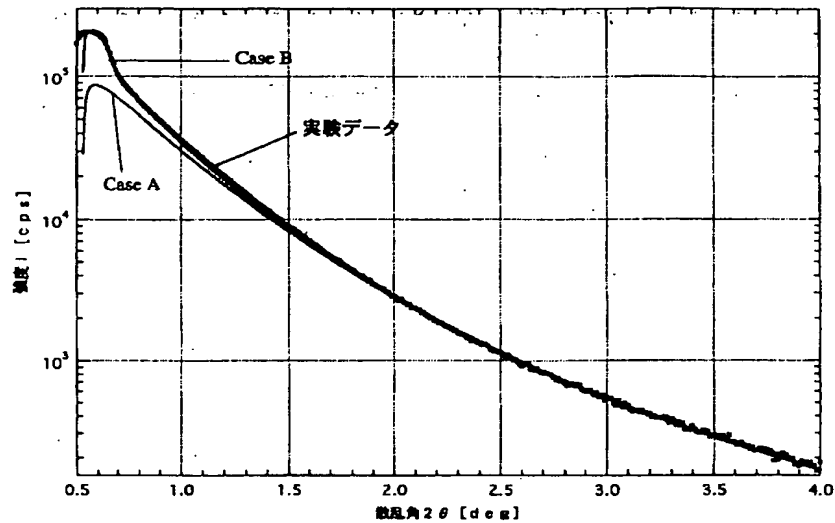
【図11】



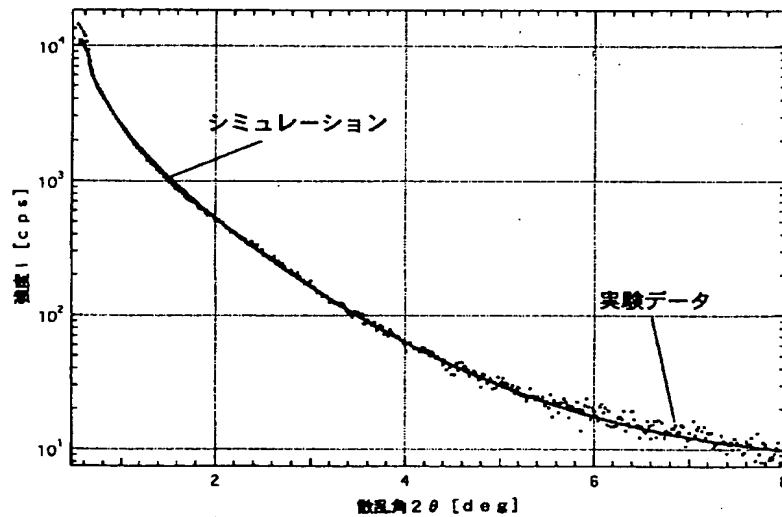
【図12】



【図13】



【図14】



フロントページの続き

(72)発明者 アレキサンダー ウリヤネンコフ
東京都昭島市松原町3-9-12 理学電機
株式会社内

(72)発明者 川村 茂
山梨県韮崎市穂坂町三ツ沢650 東京エレ
クトロン株式会社技術開発センター内
Fターム(参考) 2G001 AA01 BA14 CA01 FA08 FA25
GA05 GA13 KA04 KA10 KA20
MA05

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning
Operations and is not part of the Official Record**

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☒ **BLACK BORDERS**
- ☐ **IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES**
- ☐ **FADED TEXT OR DRAWING**
- ☐ **BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING**
- ☐ **SKewed/SLANTED IMAGES**
- ☒ **COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS**
- ☐ **GRAY SCALE DOCUMENTS**
- ☐ **LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT**
- ☐ **REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY**
- ☐ **OTHER:** _____

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.